1/xi= 0,67962485 x x = 1,4714 yi = 291,834

Ц1/х 2) = 1,81926331 ЦІ/х) = 2,32517908

с =-866,48412671 6 = 4450,61712191 а =-2332,69568587

Е

(С-1М) = -2332,69568587

4450,61712191

Ь

866,48412671

Б 2

Е(Ь = 1,33 А) = 523,790 КДж/моль

Знайдемо залежність Кратність = Г(Б) і Е = Г(Б) для С~8 зв’язків. Спочатку знайдемо залежність Кратність = Г(Б).

Для довжин зв'язків візьмемо дані:

В молекулі С8 кратність рівна 3, що підтверджують спектральні дані сполук С8, НСР, СР (7), (17), а саме частоти коливання і постійні ангармонічності (шехе), які для С=Р і С=8 зв’язків виявляються практично однакові:

С8 Ес-8 = 1,53492 А Б = 169,6 ККал/моль ше = 1285,08 см “ 1

шехе = 6,46 см “ 1

СР Ес-р = 1,5583 А Б = 122 ККал/моль ше = 1239,67 см

шехе = 6,86 см “ 1

H-C=P Бс-р= 1,5421 А Бс-н = 1,0667 А

VI = 3216,9 см“ 1 у 2 = 1278,4 см“ 1 Уз = 674,7 см “ 1

Таблиця 5. Обчислення коефіцієнтів для залежності Кратність = ДЕ) для С-8 зв’язку.

5

1/xi= 0,55005501 Xi= 1,81800 yi = 1

Ц1/x 2) = 1,11241692 ЦI/x) = 1,82236429

с = 181,87538814 Ь = -198,81807222 а = 55,33256579

т/ - • 198,81807222,181,87538814

Кратність (С-8) = 55,33256579 — +

^ I

З рівняння знайдемо:

С8 3 2 ' Ьс-8 = 1,71 А (9) Кратність (Iх-з = 1,71 А) = 1,263

8

Н 2 К-С-№ї 2 Ь с -з =1,71 А (Ю)

Ьс-и = 1,33 А

Кратність (С-8) = 1,263 Кратність (С-1Ч) = 1,686 8=С=8 Ьс-8= 1,5529 А (17)

Кратність (Ьс-з = 1,5529 А) = 2,722 Знайдемо залежність Е = ДІД для С—8 зв'язків. Для енергій зв’язків візьмемо

дані:

Таблиця 6. Обчислення коефіцієнтів для залежності Е = ДЕ) для С-8 зв'язку.

1/xi= 0,55005501 Ц1/х 2) = 1,11241692 с =-71414,57485742

xi= 1,81800 yi = 259,594

Ц1/х)= 1,82236429

Ь = 90244,55278987 а = -27772,64385690

Е

с-8 = -27772,64385690

90244,55278987

Ь

71414,57485742

Ь 2

6

З рівняння знайдемо:

8С=8 Ьс-8 = 1,5529 А Е(Ь = 1,5529 А) = 726,729 КДж/моль = 173,576 ККал/моль

Ес-8 сер = 128 ККал/моль (11)

Знайдемо залежність Кратність = ДЕ) і Е = ДЕ) для N-N1 зв'язків.

Для енергій зв’язків візьмемо дані:

Для довжин зв'язків візьмемо дані:

Знайдемо спочатку залежність Кратність = ДЕ)

Таблиця 7. Обчислення коефіцієнтів для залежності Кратність = ДЕ) для 18—N зв’язку.

1/хі= 0,68823125 хі= 1,4530 уі = 1

Ц1/х 2) = 1,96470890 ЦІ/х) = 2,41231809

с = 9,79339013 Ь = -6,68791795 а = 0,96407492

Кратність (N->0 = 0,96407492 - 6,68791795

9,79339013

Ь 2

Знайдемо залежність Е = ДЕ) для N-N1 зв'язків.

7

Таблиця 8. Обчислення коефіцієнтів для залежності Е = Г(Ь) для N-N1 зв'язку.

1/ X! = 0,68823125 Xi= 1,4530 уі= 160,781

Ц1/х 2)= 1,96470890 ЦІ/х) = 2,41231809

с = 14878,53765631 Ь = -20274,81508318 а = 7067,14065437

Е (М-И) —7067,14065437 — 20274,8 ^ 08318 + 14878 ’ 53 ^ 765631

К

З рівняння знайдемо:

N ® ь= і,пб Л Кратність = 2,835, Е = 846,001 КДж/моль

експериментально знайдено Е = 843,26 КДж/моль (19)

Знайдемо залежність Кратність = ДЕ) для N-0 зв’язків.

Для довжин зв'язків візьмемо дані:

Таблиця 9. Обчислення коефіцієнтів для залежності Кратність = ДЕ) для N-0 зв'язку.

1/ Xi = 0,68823125 Е(1/x 2)= 1,89636455 с = 84,79763896

xi= 1,4530 yi = 1,0 Е(1/x) = 2,37426095

Ь = -123,75637485 а = 46,00756377

8

Кратність (N-0) —46,00756377

123,75637485 84,79763896

Ь Ь 2

N20 N-N= 1,1282 А (ЗО)

N-0= 1,1843 А

Кратність (N-0) (Ь = 1,1843 А) = 1,969 ~ 1,97 Кратність (АНЧ) (Ь = 1,1282 А) = 2,730 Ш З ІДІМ-О) = 1,243 А (31)

Кратність (Ь = 1,243 А) = 1,328 ~ 1,33 Знайдемо залежність Е = ґ(Ь) для N-0 зв’язку.

Довжину Ь при N=0 Кратність = 2 обчислюємо за формулою:

Кратність (N-0) —46,00756377-

123,75637485 ^84,79763896

I„

V

2 — 46,00756377-

123,75637485 , 84,79763896

ь V-

44,00756377 Ь 2 - 123,75637485 Ь + 84,79763896 = О Ь= 1,18208253 А

Значення Ь = 1,63007893 А не враховуємо, оскільки виходячи з довжин зв'язків, очевидно, що при цьому кратність < 1.

Отже, N=0 Кратність = 2 Ь = 1,18208253 А N-0 Ь = 1,453 А Е = 221,900 КДж/моль

N=0 Е = 1,18208253 А Е = 607,086 КДж/моль

N0 Ь = 1,1507 А Е = 626,847 КДж/моль

Таблиця 10. Обчислення коефіцієнтів для залежності Е = ДЕ) для N-0 зв’язку.

1/X!= 0,68823125 Ц1/x 2) = 1,94454237 с =-8769,11638979

E (N-0) = -6564,31416262

xi= 1,4530 yi = 221,900 Ц1/x) = 2,40323211

Ь = 15895,54907490 a = -6564,31416262

15895,54907490 8769,11638979

Ь Ь 2

З рівняння знайдемо:

CH 3 —N0, Ьн-о = 1,224 А Е(Ь = 1,224 А) = 569,050 КДж/моль

Знайдемо залежність Кратність = ДЕ) для С—Р зв’язку.

Таблиця 11. Обчислення коефіцієнтів для залежності Кратність = ДЕ) для С—Р зв'язку.

1/ Xi = 0,53821313 E(1/x 2)= 1,08198452 с = 107,52805439

Xi= 1,8580 yi = 1

Ц1/x)= 1,79643561

Ь = -109,46128312

109,46128312 | Ь

Кратність (С-Р) —28,76548555

а = 28,76548555

107,52805439

Ь 2

Розглянемо 0-0 зв'язки.

Для довжин зв’язків візьмемо дані:

0 3 Ео-о = 1,2717 А (32)

0 2 Ео-о = 1,20735 А (33)

10

Для енергій зв'язків візьмемо дані (35)

0 2 = 20 119,11 -4,184 = 498,356 КДж/моль

0 3 = 0 2 + О 25,6 • 4,184 = 107,110 КДж/моль - це енергія дисоціації

0-0 Е = 33,2-4,187 = 139,008 КДж/моль (2)

Але енергію 0-0 зв’язку при кратності 1,5 знайдемо слідуючим чином:

0 3 = 0 2 + О 107,110 КДж/моль

0 2 = О + О 498,356 КДж/моль

0 3 = 0 + О + О 498,356 КДж/моль + 107,110 КДж/моль

Якщо ці три атоми кисню утворять молекулу озону | з О і .5

О

тоді ця енергія виділиться із утворених двох трьохелектронних зв’язків, отже Ео-о при кратности 1,5 = 302,733 КДж/моль 302,733= (^98,356 + 107,110)

НО-ОН Кратність (0-0) = 1

Кратність (0-0) = 1,5

: 0 = 0 :

Кратність (0-0) = 2

Н 2 0 2

Оз

0 2

Ео-о = 1,452 А Ео-о = 1,2717 А Ео-о = 1,20735 А

Кратність = 1 Кратність =1,5 Кратність = 2

Е = 139,008 КДж/моль Е = 302,733 КДж/моль Е = 498,356 КДж/моль

Таблиця 12. Обчислення коефіцієнтів для залежності Кратність = ДЕ) для 0-0 зв'язку

11

1/ Хі = 0,68870523 Ц1/х 2) = 1,77867464 с = 48,79304255

Кратність (0-0) = 23,89786759

Хі= 1,452 уі = 1,0 Е(1/х) = 2,30331446

Ь = -66,85172754 а = 23,89786759

66,85172754 ^48,79304255

I.

V

Таблиця 13. Обчислення коефіцієнтів для залежності E = Г(Ь) для O—O зв'язку.

1/xi= 0,68870523 Ц1/x 2)= 1,77867464 c = 21430,93279023

Xi = 1,452 Уi = 139,008 E(1/x) = 2,30331446

Ь = -29935,02909385 a = 10590,40848780

E (O-O) = 10590,40848780-

29935,02909385 ,21430,93279023

E

E 2

НСШ Ec-н= 1,0266 A

Ь c іч = 1Д679 A E N-0 = 1,1994 A

Кратність (E c-к = 1,1679 A) = 2,897 Кратність (E н-о = 1,1994 A) = 1,772

(36)

+ _

Н-С = К'-0

н-с=к-* • 6:

• •

ЇO4C0 Ь н-м = 0,987 A (36) H-M=c=0

Ь N-0= 1,207 A E c-o = 1,171 A

Кратність (E M -c = 1,207 A) = 2,549 Кратність (E c-o = 1,171 A) = 2,392

12

H1ЧC8

Ь п-н = 0,988 A (36) H-№=C=8

Ь N-0 — 1,216 A Ь c-5 = 1,560 A

Кратність (Ь c-к = 1,216 A) = 2,475 Кратність (Ь c -5 = 1,560 A) = 2,620

H

0,98 A ^N1

114

■N2

1,24 A

N 3

1,13 A

Кратність (Ь ш-н 2 =1,24 A) = 1,940 (MO ~ 1,65)
Кратність (Ь N 2 -N 3 =1,13 A) = 2,715 (MO ~ 2,64)

(37)

[N1 — N 2—^0

Кратність (Ь =1,18 А) = 2,330 I, N-N ~ 1 ? 18 А

(37)

N,0 —> :іч*т:0:

I •• •• ••

N-N= 1,1282 А (ЗО)

N-0= 1,1843 А

Кратність (Ь м-н = 1,1282 А) = 2,730 Кратність (Ь М -о = 1,1843 А) = 1,969

N0,

Ь N-0=1, 197 А (38)

Кратність (N-0) = 1,802

N,0

O

^ *ж:о:

0

N-N=1,154 А (ЗО)

N-0= 1,185 А

Кратність (Ь = 1,154 А) = 2,523 Кратність (Ь н-о = 1,185 А) = 1,959

o

N-0= 1,236 A (39) Кратність (N-0) = 1,388 ~ 1,39

.. O

:0=M=0: ь м .о=і,200 A (3O)

Кратність (N-0) = 1,765

ЛІТЕРАТУРА.

1. Ингольд К. Теоретические основи органической химии. Мир, Москва, 1973 год, с. 143 (русский перевод с 8ігисіиге а псі іпесНапйт іп ог§апіс сіістізігу. 8есопсі Есіііііоп, ІЖЮЕБ С. К., Согпеїі ТІпіуегеііу рге88 Міаса апй Бопсіоп, 1969).

2. См. (1), с.116.

3. Веденеев В.И., Гурвич Л.В., Кондратьев В.Н., Медведев В.А., Франкевич Е.Л. Знергии разрыіва химических связей. Потенциалї ионизации и сродство к злектрону. Справочник. Издательство Академии наук СССР, Москва, 1962 год, с.69-70.

4. Соїігсії ТА. Тйе 8ігєп£і1і8 оГ Сйетісаі ВопсІ8. ВиІІсгсуогіНз 8сіспіі1іс РиЬИсаііопз, Ьопсіоп, 1958.

5. Грей Г. Злектроныї и химическая связь. Мир, Москва, 1967 год, с.141 (русский перевод с ЕІЄСІШП8 а псі сйетісаі Вопс1іп§, Нагту В. Огау, Уе\у Уогк, Атаїсгсіат. 1965).

6. См. (1), с.140.

7. Краснов К.С., Филиппенко Н.В., Бобкова В.А. и др. Молекулярньїе постояннньїе неорганических соединений:

Справочник. Химия, Ленинград, 1979 год, с.36.

8. См. (1), с.144.

9. Узллс А. Структурная неорганическая химия. Мир, Москва, 1988 год, т.3, с. 17 (русский перевод с Зішсіигаї іпог§апіс сйетісігу, Л ГіЬ Есіііiоп, \Ye1I8 А. Р. Сіагепсіоп Рге88, ОхГогсІ. 1986).

10. См. (9), с.17-18.

11. См. (5), с.117.

12. См. (7), с.416.

13. См. (7), с.367.

14. Узллс А. Структурная неорганическая химия. Мир, Москва, 1987 год, т.2, с.566 (русский перевод с 8ігис1ига1 іпог§апіс сНстісІгу, йй;й Есіійоп, \Ye1I8 А. Р. Сіагепсіоп Рге88, ОхГогсі, 1986).

15. См. (7), с.365.

16. См. (7), с.198.

17. См. (7), с.106.

18. Гурвич Л. В., Карачевцев Г. В., Кондратьев В. Н., Лебедев Ю. А., Медведев В. А., Потапов В. К., Ходеев Ю. С. Знергии разрыва химических связей. Потенциальї ионизации и сродство к злектрону. Наука, Москва, 1974 год, с.97.

19. См. (7), с.42.

20. См. (7), с.312.

21. См. (7), с.216.

22. Матье Ж., Панико Р. Курс теоретических основ органической химии. Мир, Москва, 1975 год, с.20 (русский перевод с МЕСАМЗМЕ8 КЕАСТIО№4ЕЕ8 ЕИ СНIМIЕ ОКСАМдЦЕ МАТНIЕII I., РАМСО Я., Неппапп, 1972).

23. См. (14), с.612.

24. Колодяжньïй О. И. Химия илидов фосфора. Наукова думка, Киев, 1994 год, с.255.

25. См. (14),с.611.

26. Узллс А. Структурная неорганическая химия. Мир, Москва, 1987 год, т.2, с.558 (русский перевод с \Уе1I8 А. Р. 8iгис1ига1 iпог§апiс сйетiсiгу, Рiйй Есiiйоп, Сiагепсiоп Рге88, ОхЕогсI).

27. Узллс А. Структурная неорганическая химия. Мир, Москва, 1987 год, т.2, с.562 (русский перевод с \Уе1I8 А. Р. Зiшсйггаï iиог§апiс сйетiсiгу, Рiйй Есiiйоп, Сiагепсiоп Рге88, Охйогсi).

28. Гордон А., Форд Р. Сиутник химика. Физико-химические свойства, методики, библиография. Мир, Москва, 1976 год, с.127 (русский перевод с ТНЕ СНЕМI8Т'8 СОМРАХКЖ А НАХБВООК ОР РКАСТIСАй БАТА, ТЕСНМдШЗ, АИБ РЕРЕРЕХСЕЗ. АIШОЕБ I. СОКЕХЖ Рйгег, Iпс., ШСНАКБ А. РОКЕ> Мопi§отегу Со11е§е, А \УIЙЕУ-ЮТЕК8СIЕХСЕ РЕIВЕIСАТIОУ, ЮНУ ШЙЕУ АИБ ЗСЖЗ, Хе\¥ Уогк - йопсiоп - Зусiпеу -Тогопiо, 1972).

29. См. (7), с.110.

30. См. (7), с.124.

31. См. (7), с.218.

32. См. (7), с.130.

33. См. (7), с.46-47.

34. См. (7), с.236.

35. См. (18), с.106.

36. См. (7), с.200.

37. См. (14), с.564.

38. См. (7), с.122.

39. См. (14), с.577.

40. См. (14), с.543.